

学校编号: 10384

分类号\_\_\_\_\_密级\_\_\_\_\_

学号: B9824301

UDC\_\_\_\_\_

厦 门 大 学 博 士 学 位 论 文

## 平均键能物理内涵与肖特基势垒和异质结带阶的研究

李 书 平

指导教师: 王仁智教授, 博士生导师

专业名称: 凝聚态物理

学位级别: 博士

论文提交日期: 2001 年 4 月

论文答辩日期: 2001 年 月

学位授予单位和日期: 厦门大学, 2001 年 月

答辩委员会主席:

评阅人:

2001 年 4 月

# **Physical Connotation of Average-Bond-Energy and Study of Schottky Barrier and Heterojunction Band Offset**

Dissertation for Ph. D.

By **Li Shuping**

Supervisor: **Professor Wang Renzhi**

Department of Physics, Xiamen University,

The People's Republic of China, April 2001

## **Physical Connotation of Average-Bond-Energy and Study of Schottky Barrier and Heterojunction Band Offset**

**Li Shuping**

### **ABSTRACT**

Metal-semiconductor contacts are very important in technology. They are widely used in semiconductor devices and integrate circuits. The quality and reliability of semiconductor devices and integrate circuits greatly rely on the properties of metal-semiconductor contacts. The valence band offset  $\Delta E_v$  and conduction band offset  $\Delta E_c$  of heterojunction interface determine the depth of potential well and other basic properties of quantum well and superlattice. It is an important ingredient of modern “energy band project” to predict, modify or control the band offset (namely energy band clipping). The experimental and theoretical study of Schottky barrier of metal-semiconductor contact and band offset of heterojunction is closely related to the progress of new subject on surface and interface. Based on different experimental results, different theoretical models on Schottky barrier and heterojunction band offset have been proposed using different reference levels. In this thesis, we studied the intrinsic relationship between average-bond-energy  $E_m$  and Fermi-level  $E_F$  in energy bands of free electrons and metals. We find that the average-bond-energy is equivalent to Fermi-level. For semiconductor, average-bond-energy and “innate Fermi-level” have same physical connotation. A theoretical calculation method was established that can be applied to both Schottky barrier and heterojunction band offset, *i.e.* average-bond-energy method. Combined with the deformation potential, the average-bond-energy method was extended to the study of strained layer heterojunction band offset. Based on the character of average-bond-energy

method, we brought forward a simplified model to calculate strained layer heterojunction band offset. This dissertation is composed of five chapters. Chapter 1 is concerned with the research background and theoretical basis. The main contents and results of Chapters 2 – 5 are summarized as follows.

In Chapter 2, we investigated the relationship of average-bond-energy and Fermi-level  $E_F(\text{free})$  in free electronic energy band by studying ten face-centered cubic semiconductor crystals, Si, Ge, GaP, InP, AlAs, GaAs, InAs, AlSb, GaSb and InSb, three hexagonal metal crystals, Ti, Zr, Hf, and body-centred tetragonal metal crystal,  $\beta$ -Sn. The valence electrons were approximated by free electrons. The Fermi-level  $E_F(\text{free})$  was calculated according to the radius of Fermi sphere filled by free electrons. The free electronic energy bands, under the equilibrium state and the strain states of hydrostatic pressure and the uniaxial strain, respectively, were considered. The Fermi-level  $E_F^{ID}(\text{free})$  was computed based on the highest filled state of electrons in the free electronic energy band. According to the calculated eigenvalues of free electronic energy band, the average-bond-energy  $E_m$  was obtained using the equation (1.2.11) in this dissertation. The results indicate that not only the average-bond-energy  $E_m$  and the Fermi-level  $E_F(\text{free})$  (or  $E_F^{ID}(\text{free})$ ) are very close to each other under the equilibrium states, but also they obey the same variation rule under the strained states. Therefore,  $E_m$  is equivalent to  $E_F(\text{free})$  in free electron energy band model. Equation (1.2.11) can be used to calculate the Fermi-level  $E_F(\text{free})$  of free electron system.

In Chapter 3, we studied the relationship of average-bond-energy  $E_m$  and Fermi-level  $E_F^{ID}$  in metal energy band. The energy band of the metal crystals with hexagonal close-packed structure, Ti, Zr, Hf, and body-centred tetragonal  $\beta$ -Sn were calculated by the first principle pseudopotential method. The Fermi-level  $E_F^{ID}$  was determined by the highest filled state of valence electrons. It is found that the average-bond-energy  $E_m$  of these four metals is also very close to the Fermi-level  $E_F^{ID}$ . The variation trends of  $E_m$  and  $E_F^{ID}$  with the number  $N_p$  of

plane wave base function adopted in the energy band calculation are similar. The regularity of  $E_m$  and  $E_F^{ID}$  changing with the strained states of hydrostatic pressure and uniaxial strain are the same. Therefore, as in the case of free electronic energy band, the average-bond-energy  $E_m$  is also equivalent to the Fermi-level  $E_F^{ID}$  in metal energy band.

In Chapter 4, we studied the physical connotation of average-bond-energy in semiconductor energy band and the application of average-bond-energy in the theoretical calculation of Schottky barrier and heterojunction band offset. According to the energy band theory, the valence electron states are characterized by the energy band structure of Brillouin zone. In semiconductor energy band with forbidden gap, the four valence bands are full of valence electrons and all conduction bands are empty. We call the Fermi-level of a semiconductor at such state “innate Fermi-level” in order to distinguish it from “intrinsic Fermi-level” of semiconductor which has been defined in the semiconductor physics. It is worthy to note that the Fermi-level of a semiconductor cannot be determined by the highest filled state of energy band like other cases. We find that the regularity of average-bond-energy  $E_m$  varying with the number  $N_p$  of plane wave base function is the same as that for metal.

For the average-bond-energy  $E_m$  in semiconductor and Fermi-level  $E_F$  (*free*) in free electron, both varying regularity with the strain states of hydrostatic pressure and uniaxial are quite adjacent. That is to say, for the deformation potentials  $a_m$  and  $a_F$  (*free*) of  $E_m$  and  $E_F$  (*free*), the signs are the same, and the values are close. All these results indicate that the average-bond-energy  $E_m$  of semiconductor has some important physical connotation of Fermi-level  $E_F$ . From the viewpoint of calculation method, all physical parameters used to obtain  $E_m$  have no direct relation with the forbidden band. Therefore, if the calculated  $E_m$  corresponds to the Fermi-level in free electronic energy band and metal energy band, it should also correspond to the innate Fermi-level  $E_F$  in semiconductor energy band. Based on this deduction, we calculated some metal-semiconductor

contact barriers and heterojunction band offsets. The results are reasonable, proving the correctness of the deduction.

In Chapter 5, we studied the application of average-bond-energy method in the investigation of strained layer heterojunction band offset. If the average-bond-energy in semiconductor corresponds to the innate Fermi-level, it should be aligned on the two sides of strained layer heterojunction interface, so it can be used to determine the heterojunction band offset. In this chapter, we take the average-bond-energy as a reference level, adopt three different methods to calculate the average band offset parameter  $E_{mv,av}$  of heterojunction. Through a detailed study of the effect of hydrostatic and uniaxial strains on the band offset parameter, we suggest a simplified calculation method of strained layer heterojunction band offset. Using this simplified method, the calculated band offset parameter  $E_{mv,0}$  without strain and the experimental values of the deformation potential  $b$  and spin-orbit splitting  $\Delta_o$  are already enough to predict the strained heterojunction band offset at different strained states. It is not necessary to calculate the energy band under various strain conditions and the band offset parameter deformation potential. Therefore, it can largely reduce the calculation work and is convenient in practice application. The simplified method demonstrates the modulation mechanism of crystal strain on band offset. Although there are hydrostatic pressure strain and uniaxial strain in the strained layer, the uniaxial strain is the main factor adjusting the band offset. The simplified calculation method is a unique advantage of the average-bond-energy method, because in other calculation methods the deformation potential value  $a_v$  is not small enough to be ignored.

**Key words :** average-bond-energy, Schottky barrier, heterojunction band offset

# 目 录

英文摘要.....	i
论文摘要.....	vi i
第 1 章 涉及本课题的研究背景和理论基础简介.....	1
§ 1.1 金属-半导体接触肖特基势垒.....	2
§ 1.2 半导体异质结带阶.....	5
§ 1.3 半导体应变层异质结中应变层的价带与带隙.....	11
1. 考虑自旋-轨道耦合 (SO 分裂) 作用的价带.....	11
2. 应变状态下的价带、导带、带隙和带阶参数及其形变势.....	13
§ 1.4 赝势能带计算方法.....	17
1. 经验赝势能带计算方法.....	18
2. 第一原理赝势能带计算方法.....	20
参 考 文 献.....	22
第 2 章 自由电子能带模型、费米能级和平均键能.....	25
§ 2.1 自由电子费米能级和平均键能的计算方法.....	26
1. 自由电子系统的费米能级 $E_F$ .....	26
2. 自由电子能带模型的费米能级 $E_F^{ID}$ .....	27
3. 自由电子能带模型中的平均键能 $E_m$ .....	30
§ 2.2 费米能级 $E_F$ 、 $E_F^{ID}$ 和平均键能 $E_m$ 的计算结果.....	30
§ 2.3 自由电子费米能级 $E_F$ 、 $E_F^{ID}$ 和平均键能 $E_m$ 的形变势研究.....	35
§ 2.4 小 结.....	38
参 考 文 献.....	40
第 3 章 金属能带中的平均键能与费米能级.....	41

§ 3.1 金属晶体的能带结构、费米能级 $E_F^{ID}$ 和平均键能 $E_m$ .....	41
§ 3.2 平均键能 $E_m$ 和费米能级 $E_F^{ID}$ 随哈密顿矩阵阶数的变化关系 .....	45
§ 3.3 平均键能 $E_m$ 和费米能级 $E_F^{ID}$ 随应变状态的变化关系 .....	47
§ 3.4 小 结 .....	50
参 考 文 献 .....	51
第 4 章 半导体中的平均键能、肖特基势垒和异质结带阶 .....	53
§ 4.1 半导体能带结构、带隙和带阶参数的计算 .....	53
§ 4.2 半导体能带中有关费米能级的几个问题 .....	55
§ 4.3 半导体能带中平均键能 $E_m$ 的有关行为 .....	59
1. 平均键能随计算能带的哈密顿矩阵阶数的变化关系 .....	60
2. 半导体能带中平均键能随应变状态的变化关系 .....	61
3. 平均键能 $E_m$ 与费米能级 $E_F^{ID}$ 、电中性能级 $E_B$ 计算方法的比较 .....	64
§ 4.4 肖特基势垒高度和异质结带阶理论计算中的平均键能方法 .....	65
1. 金属-半导体接触肖特基势垒高度的理论计算 .....	65
2. 异质结价带带阶的理论计算 .....	68
§ 4.5 小 结 .....	69
参 考 文 献 .....	71
第 5 章 应变层异质结带阶理论计算中的平均键能方法 .....	73
§ 5.1 流体静压力应变或单轴应变时的平均键能 $E_m$ 和平均价带 $E_{v,av}$ .....	74
§ 5.2 双轴应力下平均价带、平均键能、带阶参数和它们的形变势 .....	78
§ 5.3 应变层异质结价带带阶 $\Delta E_v$ 的计算 .....	80
§ 5.4 应变层异质结导带带阶 $\Delta E_c$ 的计算 .....	86
§ 5.5 小 结 .....	89
参 考 文 献 .....	91



## 论 文 摘 要

金属-半导体接触在技术上十分重要，在半导体器件和集成电路中广泛地利用着各种不同性质的金属-半导体接触，因而器件与集成电路的质量和可靠性在很大程度上依赖于电路中金属-半导体接触的性质；半导体异质结的价带带阶 $\Delta E_v$ 和导带带阶 $\Delta E_c$ 决定着量子阱和超晶格的势阱深度及其基本特性，预言、调节或控制带阶的“能带剪裁”新技术是当今“能带工程”的重要组成部分。金属-半导体接触 Schottky 势垒和异质结带阶的实验和理论与“表面与界面”新兴学科的研究进展紧密相关，基于不同实验结果的不断发现，先后提出 Schottky 势垒和异质结带阶的不同理论模型。关于 Schottky 势垒或异质结带阶，已提出的理论模型和计算方法多种多样，尚未统一，各种不同理论模型的计算中采用的参考能级也不相同。在本课题研究中，我们研究了自由电子能带和金属能带中平均键能 $E_m$ 与费米能级 $E_F$ 的内在联系，发现平均键能相当于费米能级；在半导体能带中，着重研究了平均键能 $E_m$ 与半导体“固有费米能级”所具有的共同物理内涵，揭示了平均键能的物理实质，建立了一种同时适用于 Schottky 势垒和异质结带阶的理论计算方法，即“平均键能方法”；并结合有关形变势的研究，将“平均键能方法”推广应用于应变层异质结带阶的理论计算，同时根据平均键能方法的特点，提出应变层异质结带阶的简化计算方案。本论文由五章组成，第 1 章介绍涉及本课题的研究背景和理论基础，第 2 至 5 章研究内容与结果的提要如下。

第 2 章，研究自由电子能带模型中的平均键能与费米能级间的关系。对于 Si、Ge、GaP、InP、AlAs、GaAs、InAs、AlSb、GaSb 和 InSb 等 10 种面心立方半导体晶体和六角结构的 Ti、Zr、Hf 与体心四方的 Sn 等 4 种金属晶体，将它们的价电子近似为自由电子。一方面根据自由电子填充的费米球半径计算它们的费米能级 $E_F$ ；另一方面，计算这些晶体在平衡时以及流体静压力应变和单轴应变状态下的自由电子能带结构，由电子在能带中的“最高填充态”计算其费米能级 $E_F^{ID}$ 。与此同时，根据自由电子能带本征值的计算结果，引用正文中式 (1.2.11) 计算它们的平均键能 $E_m$ ，着重研

究了  $E_F$ 、 $E_F^{ID}$  与  $E_m$  三者间的关系。数值计算中发现，不但晶体处于平衡时其平均键能  $E_m$  值非常接近于费米能级  $E_F$ （或  $E_F^{ID}$ ）值，而且在晶体发生流体静压力应变和单轴应变时， $E_m$  与  $E_F$  随应变状态的变化规律也是相同的。研究结果表明，在自由电子能带模型中平均键能  $E_m$  相当于费米能级  $E_F$ ，我们建立的  $E_m$  计算公式可以用来计算自由电子系统的费米能级  $E_F$ 。

第 3 章，研究金属能带中的平均键能与费米能级间的关系。对于六角结构 (hcp) Ti、Zr 和 Hf 以及体心四方(bcc)  $\beta$ -Sn 等 4 种不同的金属晶体，采用第一原理赝势法计算它们的能带结构，由价电子“最高填充态”确定其费米能级  $E_F^{ID}$ ，并计算其平均键能  $E_m$  值，探讨  $E_m$  与  $E_F^{ID}$  的关系。研究结果表明，在上述 4 种金属能带中，不仅  $E_m$  与  $E_F^{ID}$  在数值上非常接近， $E_m$  与  $E_F^{ID}$  两者随能带计算中采用的平面波基函数的数目的变化趋势也相当接近，而且  $E_m$  与  $E_F^{ID}$  随晶体的流体静压力应变和单轴应变的变化规律也是相同的。所以与自由电子能带中所发现的情况类似，金属能带中的  $E_m$  也相当于费米能级  $E_F^{ID}$ ，平均键能  $E_m$  的计算公式也可以用来计算这些金属晶体的费米能级。

第 4 章，研究半导体能带中平均键能的物理内涵及其在肖特基势垒和异质结带理论计算中的应用。在能带理论中，以布里渊区中整体的能带结构表征晶体的价电子态。对于出现禁带的半导体能带，4 个价带填满价电子、所有导带是空态。我们把这种价电子状态的费米能级称为半导体“固有费米能级”，以区别于半导体物理中已经定义的“本征半导体费米能级”。研究中，我们先说明通常在能带计算中采用的由“最高填充态”确定费米能级的方法不适用于半导体，半导体物理中根据简化能带定义的“本征半导体费米能级”也不同于半导体“固有费米能级”；然后着重研究了平均键能  $E_m$  的物理内涵。研究中发现：半导体的平均键能  $E_m$  随计算能带的哈密顿矩阵阶数  $N_p$  的变化规律与金属的情况相同； $E_m$  和  $E_F$  随单轴应变及流体静压力应变的变化规律也相当接近，两者的应变势  $a_m$  与  $a_F$  (free) 符号相同、数值接近；这些研究结果表明，半导体  $E_m$  具有费米能级的一些重要的物理内涵；从计算方法考虑，在计算  $E_m$  的公式中，各个物理量都与是否出现带隙没有直接联系。因此若它的计算值在自由电子能带和金属能带中都相当于费米能级，在半导体中也应该相当于“固有费米能级”。

这是一个推论，我们将其应用于金属-半导体接触势垒高度和异质结带阶的实际计算中，获得了比较合理的计算结果，证实了推论的合理性。

第 5 章，探讨平均键能方法在应变层异质结带阶理论计算中的应用。如果半导体中平均键能相当于“固有费米能级”，它应该在应变层异质结界面两侧相互“对齐”，可用于确定应变层异质结的带阶。本章以平均键能作为参考能级，对于应变层的平均带阶参数  $E_{mv,av}$ ，采用 3 种不同的计算方案，通过计算结果比较和应变状态对带阶参数影响途径的仔细研究，提出了应变层异质结带阶的一种“简化计算方案”。该计算方案在应变层异质结带阶的计算中，只要采用能带计算方法计算体材料在平衡时的带阶参数  $E_{mv,0}$  值，然后直接引用形变势  $b$  和 SO 裂距  $\Delta_o$  的实验值，就可以预言不同应变状态下的带阶，无须计算应变层的能带结构和带阶参数形变势，因而大大减少计算工作量，使之更便于实际应用；从物理模型上考虑，该简化计算方案进一步揭示了晶体应变对带阶调节作用的机制，这就是，虽然应变层中同时存在流体静压力应变和单轴应变，但对带阶起调节作用的主要是单轴应变；这种简化计算模型是平均键能方法所特有的，因为其他计算方法中形变势  $a_v$  都比平均键能方法的  $a_{mv}$  大得多，不可能采用类似的简化方法。

**关键词：**平均键能，肖特基势垒，异质结带阶

厦门大学博士论文摘要库

## 第 1 章

## 涉及本课题的研究背景和理论基础简介

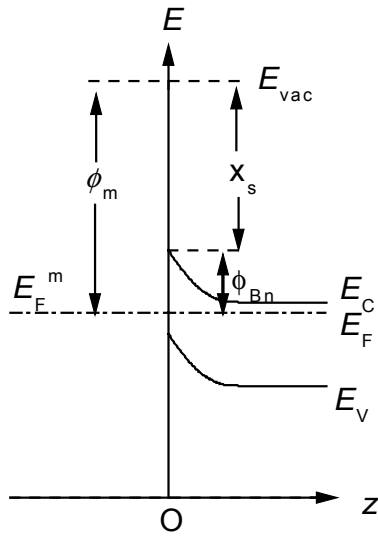
本章介绍涉及本课题的研究背景、理论基础和计算方法，说明本项目研究选题的一些有关问题。金属-半导体接触在技术上十分重要，在半导体器件和集成电路中广泛地利用着各种不同性质的金属-半导体接触，因而器件与集成电路的质量和可靠性在很大程度上依赖于电路中的金属-半导体接触的性质；半导体异质结的价带带阶  $\Delta E_v$  和导带带阶  $\Delta E_c$  决定着量子阱和超晶格的势阱深度及其基本特性，预言、调节或控制带阶的“能带剪裁”新技术是当今“能带工程”的重要组成部分。金属-半导体接触 Schottky 势垒和异质结带阶的实验和理论与“表面与界面”新兴学科的研究进展紧密相关，基于不同实验结果的不断发现，先后提出 Schottky 势垒和异质结带阶的不同理论模型。众所周知，对于 pn 结的势垒高度、电流传输以及 pn 器件原理的有关物理问题，均可以依据半导体物理中定义的“费米能级”或“准费米能级”进行说明与计算。然而，与 pn 结的情况不同，关于 Schottky 势垒或异质结带阶，提出的理论模型和计算方法多种多样，尚未统一，在各种不同理论模型的计算中采用的参考能级互不相同。下面我们将介绍  $sp^3$  杂化能  $E_h$ 、介电隙中能级  $E_D$ 、电中性能级  $E_B$  和平均键能  $E_m$  等 4 种不同的参考能级中，只有参考能级  $E_B$  同时用于确定 Schottky 势垒和异质结带阶，其他的 3 种参考能级只用于计算异质结带阶，未能用于计算 Schottky 势垒。在本课题的研究中，我们将分别在自由电子能带、金属能带和半导体能带中，探讨平均键能  $E_m$  与费米能级的内在联系，揭示平均键能的物理内涵，建立一种同时适用于 Schottky 势垒和异质结带阶的理论计算方法，即“平均键能方法”，并结合有关形变势的研究，将“平均键能方法”推广应用于应变层异质结带阶的理论计算。关于异质结带阶、金属-半导体接触势垒和半导体表面与界面的研究情况及其重要的研究成果在谢希德、陆栋<sup>[1]</sup>及黄昆 夏建白<sup>[2]</sup>近期的专著中已作了较全面的介绍。下面对涉及本课题的有关方面作简要说明。

### § 1.1 金属-半导体接触肖特基势垒

金属-半导体接触在技术上十分重要。在半导体和集成电路中广泛地利用着各种不同性质的金属-半导体接触，主要有肖特基（Schottky 势垒）二极管和欧姆接触。早在 25 年前 Andrew<sup>[3]</sup>就估计，在中规模集成电路中平均有 68 个肖特基和 400 个欧姆接触。当今的超大规模集成电路中，金属-半导体接触的数目更是难计其数的，因而集成电路的质量和可靠性在很大程度上依赖于电路中的金属-半导体接触的性质。金属-半导体接触的整流性质是一个古老的固体物理问题，它的发现可追溯到 1874 年 Braun<sup>[4]</sup>对金属-硫化铜导电性质不对称性的研究。Schottky<sup>[5]</sup>最早（1939 年）较系统地研究了金属-半导体接触及其整流特性，近似地确定了势垒的形状及其电流输运机制，因此通常把金属-半导体接触势垒称为肖特基势垒（Schottky Barrier）。差不多同时，Mott<sup>[6]</sup>也提出了类似的理论。按照他们的理论模型，如果  $\phi_m$  为金属的脱出功， $\chi_s$  是半导体的亲和势（即真空能级与导带底之间的能差），则对于 n 型和 p 型半导体的金属-半导体势垒高度  $\phi_{Bn}$  和  $\phi_{Bp}$  分别为：

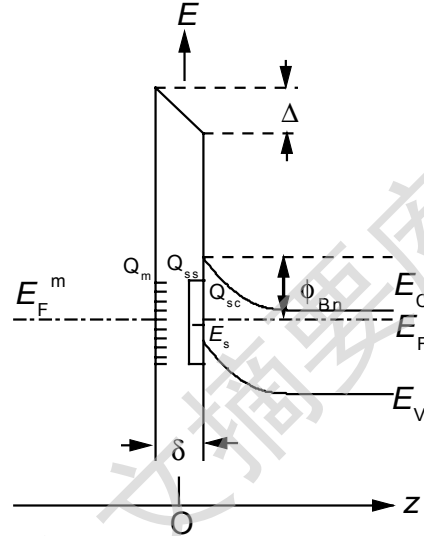
$$\phi_{Bn} = \phi_m - \chi_s, \text{ 和 } \phi_{Bp} = E_g - \phi_{Bn} \quad (1.1.1)$$

其中  $E_g$  是半导体的禁带宽度。按照式（1.1.1）的 Schottky-Mott 模型，势垒高度决定于金属的功函数与半导体的亲和势的差值（如图 1.1a 所示）。但在许多共价键半导体的研究中发现，肖特基势垒高度几乎与金属的功函数无关，简单的 Schottky-Mott 模型对这些半导体是不适用的。1947 年巴丁（J. Bardeen）<sup>[7]</sup>指出半导体表面态的存在可以严重影响肖特基势垒。如果半导体禁带中有密度足够高的表面态，费米能级被钉扎在禁带中，使得肖特基势垒高度几乎不受金属功函数的影响。Bardeen 提出的金属-半导体接触模型的如图 1.1b 所示。图中  $E_s$  是金属与半导体接触之前半导体表面态中的费米能级  $E_F^s$ 。在金属-半导体接触模型中，如果  $E_s$  和半导体费米能级  $E_F$  处于同一能量水平线上，半导体表面保持电中性， $E_s$  偏离  $E_F$  时，半导体表面就存在表面电荷  $Q_{ss}$ （面电荷密度）。Cowl ey 和 Sze<sup>[8]</sup>针对图 1.1（b）金属-半导体接触 Bardeen 势垒模型，根据平衡时金属表面态中的面电荷密度  $Q_m$  应该与半导体表面态的面电荷密度  $Q_{ss}$  和半导体势垒的面电荷密度  $Q_{sc}$  相平衡，即：



肖特基模型

图 1.1a



巴丁模型

图 1.1b

$$Q_m + Q_{ss} + Q_{sc} = 0 \quad (1.1.2)$$

推导出肖特基势垒高度的一般表达式，最后写成

$$\phi_{Bn} = C(\phi_m - \chi_s) + (1-C)(E_g - E_s) \quad (1.1.3a)$$

$$C = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + q\delta D_s} \quad (1.1.3b)$$

其中， $E_g$  为半导体的禁带宽度， $D_s$  是半导体表面态的态密度， $\epsilon_i$  是界面层的电容率， $\delta$  是界面层的厚度。由该势垒高度计算式可以看到：

(1) 当  $D_s \rightarrow \infty, C \rightarrow 0$ 。在这种情况下，界面上的费米能级由表面态“钉扎”在价带上方的  $E_s$  处。这时

$$\phi_{Bn} = E_g - E_s \quad \text{和} \quad \phi_{Bp} = E_s \quad (1.1.4)$$

势垒高度与金属功函数  $\phi_m$  无关，这就是 Bardeen 提出的势垒模型。

(2) 当  $D_s \rightarrow 0, C \rightarrow 1$ 。势垒高度为  $\phi_{Bn} = \phi_m - \chi_s$ ，这就是式 (1.1.1) Schottky- Mott 模型的结果。

巴丁提出的半导体表面态将表面费米能级“钉扎”在半导体禁带中的理论可以说明势垒高度几乎和金属的功函数无关的实验事实。这个理论模型把半导体表面电子态的研究与金属-半导体界面的研究联系在一起。70 年代初对 Si (111) 表面的研究结果<sup>[9-12]</sup>支持了巴丁（存在表面态）的理论，但后来的 GaAs(110) 等 III-V 族化合物半导体的解理面的研究表明在禁带中不存在本征的表面态<sup>[13-14]</sup>，这就造成巴丁理论模型的危机。1965 年 V. Heine<sup>[15]</sup> 提出金属诱生能隙态（metal-induced gap states, MIGS）的概念，当金属与半导体的能隙同处在一个能量范围时，金属中电子的波函数在界面将衰减进入半导体，对于半导体，在界面处的波函数应与金属导带同一能量的布洛赫波函数相匹配。这种状态的能谱是落在半导体能隙中的连续谱，它就是 V. Heine 所说的 MIGS。它们在金属-半导体界面势垒形成中起着类似巴丁模型表面态的作用。实际上半导体能隙里出现 MIGS 是减少同等数目的体内状态为代价的，靠近价带顶的 MIGS 具有施主特性，从这些状态给出电子，界面区就带正电荷；相反，靠近导带底的 MIGS 具有受主特性，如果它接受电子，界面区就带负电。这两种特性使界面保持电中性。J. Tersoff 参照 Tejedor 等提出的中性能级的概念<sup>[16]</sup>，认为 MIGS 实际上是半导体中具有复波矢的布洛赫态。他们把价带和导带看成是复波矢空间的两个黎曼曲面，支点将这两个黎曼曲面分开，支点的能量记为  $E_B$ ，它就是电中性能级。电中性要求电子占据那些主要来自价带的复波矢态，而让那些主要来自导带的复波矢态空出来，所以  $E_B$  相当于满足电中性条件时界面态中的费米能级  $E_F^S$ 。J. Tersoff<sup>[17-18]</sup> 建立了一种由原胞平均的实空间格林函数  $G(\mathbf{R}, E)$  计算电中性能级  $E_B$  的方法，这就是

$$G(\mathbf{R}, E) = \int d^3r \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})}{E - E_{n\mathbf{k}}} = \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}}{E - E_{n\mathbf{k}}} \quad (1.1.5)$$

其中， $\mathbf{k}$  是布里渊区中的波矢， $n$  是能带序号， $\mathbf{R}$  是格矢量， $\psi_{n\mathbf{k}}$  是能带本征值  $E_{n\mathbf{k}}$  的布洛赫波函数。因为  $E_B$  在能隙中，从式 (1.1.5) 可以看到，价带和导带对  $G(\mathbf{R}, E)$  的贡献是符号相反的，可以将  $E_B$  定义为价带和导带对  $G$  的贡献满足  $G(\mathbf{R}, E) = 0$  的特定能量。在他的实际计算中，先采用 LAPW (linearized augmented-plane-wave method) 能带计算方法计算半导体材料的能带本征值  $E_{n\mathbf{k}}$ ，然后采用式



Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to [etd@xmu.edu.cn](mailto:etd@xmu.edu.cn) for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库